数理解析研究所講究録
56巻 1968年 89-92

不規則鎖のエルゴード問題

京大基研　松田博嗣

合金，液体金属，乃至は半導体の不純物帯におけるように不規則なポテンシャルの場で運動する電子のエネルギー固有状態が空間的に局在しているかどうかは伝導現象の特質と関連して物性論上興味ある問題である。ここでは一次元における波動関数の局在性を論ずる際にエルゴード問題が現れることを簡単に紹介する。

一次元一電子波動関数 $\psi(x)$ は次の型の Schrödinger 方程式をみたす。

$$-d^2\psi/dx^2 + V(x)\psi = k^2\psi \qquad (1)$$

ここに $V(x)$ は不規則なポテンシャル，k^2 は $\psi(\pm L)=0$ としたときの固有値とする。

(1)の解の特徴を調べるために，Borland [Proc. Roy. Soc. A 274 (1963), 529] は $x=0$ で初期条件を与えた場合，(1)の解が $x\to\infty$ でどのような振舞をするかを考察した。簡単のため

$$V(x) = -\mu \sum_i \delta(x-x_i) \quad , \qquad (x_i \le x_{i+1}) \qquad (2)$$

として間隔 $a_i = x_i - x_{i-1}$ は分布密度関数 $p(a_i)$ で互に相関なく不規則に分布している場合を考える。今(1)の解として

$$\psi = A_i \cos\left[k(x-x_i) + \varepsilon_i\right], \qquad (x_{i-1} < x < x_i) \tag{3}$$

とおくと，ψ の連続性より位相 ε_i は ε_{i-1} と a_i の関数になり

$$\varepsilon_i = F(\varepsilon_{i-1},\ a_i), \tag{4}$$

また

$$\begin{aligned}(A_{i+1}/A_i)^2 &= d\varepsilon_i/d\varepsilon_{i+1} = f(\varepsilon_i) \\ &= 1 - \frac{\mu}{k}\sin(2\varepsilon_i) + \frac{\mu^2}{k^2}\cos^2\varepsilon_i,\end{aligned} \tag{5}$$

従って

$$\log\left(A_{i+N}^2/A_i^2\right) = \sum_{j=0}^{N-1} \log f(\varepsilon_{i+j}) \tag{6}$$

なることが示され，ε_i の分布密度関数 $\rho(\varepsilon_i)$ は

$$\rho_i(\varepsilon_i) = \iint p(a_i)\,\rho_{i-1}(\varepsilon_{i-1})\,\delta\left(\varepsilon_i - F(\varepsilon_{i-1}, a_i)\right) d\varepsilon_{i-1}\, da_i \tag{7}$$

をみたし，ε_i はマルコフ鎖を作っていることになる。この鎖についてエルゴード性が成立てば，$\rho_i(\varepsilon)$ の極限分布 $\rho_\infty \equiv \lim_{i\to\infty} \rho_i$ が存在し，(7)より ρ_∞ が求められ，

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \log \left(A_{i+N}^2 / A_i^2 \right) = \int \log f(\varepsilon) f_\infty(\varepsilon) \, d\varepsilon \qquad (8)$$

となる。$p(a)$ が有界であるときはエルゴード性は保証されており，$k^2 \to \infty$ の極限で Borland は確率1で

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \log \left(A_{i+N}^2 / A_i^2 \right) > 0$$

で，波動関数は指数関数的に増大することを示した。このことは $\psi(L)$ および $\psi(-L)$ で初期条件を与えて解いた解が共に確率1で増大することになり，この性質は二つの解が滑らかにつながる固有解に対しても成立つであろうから，局在した解を与えるとした。しかし $p(a)$ が δ関数的特異性をもつ場合については果してエルゴード性が成立つかどうかよく判っていないようである。

最近筆者は，

$$-(b_n + k^2) u_n + u_{n-1} + u_{n+1} = 0 \qquad (9)$$

なる形の差分方程式について b_n が分布をもつとき $\lim_{n\to\infty} |u_n / u_0|$ の指数関数的発散と解の局在性の関係について考察したが，これを数値の質量が不規則に分布する振動子鎖の問題と見ると，$p(a)$ はδ関数的特異性をもつ場合に対応する。この種エルゴード問題と不規則微分方程式の解

の性質の研究について数学の方から教示を得ることが出来れば幸甚と考え，敢えてコメントをした次第である。